About the different ontological levels of chemistry

Juan Camilo Martínez González
ORCID.ORG/0000-0002-7239-1763
CONICET-Universidad de Buenos Aires
Facultad de Filosofía y Letras Instituto de Filosofía Dr. Alejandro Korn
olimac62@hotmail.com

Abstract: *In this article, the relationships between the different ontological levels involved in chemistry are analyzed: between the macro-chemistry of substances and molecular micro-chemistry, and between this last one and quantum mechanics. In both cases, the aim is to stress the deep breakdown resulting from the difference between the ontological categories that structure the considered domains. On this basis, possible philosophical perspectives to address those relationships are discussed: reductionism, emergentism and pluralism. Finally, it is considered whether quantum chemistry can supply an adequate link to relate the quantum physical level and the molecular chemical level.*

Keywords: chemistry of substances, molecular chemistry, quantum mechanics, quantum chemistry, inter-theoretic relationships.

Received: 19/03/2024 **Accepted:** 20/08/2025

Acerca de los diferentes niveles ontológicos de la química

Juan Camilo Martínez González
ORCID.ORG/0000-0002-7239-1763
CONICET-Universidad de Buenos Aires
Facultad de Filosofía y Letras Instituto de Filosofía Dr. Alejandro Korn
olimac62@hotmail.com

Resumen: En este artículo se analizan las relaciones entre los diversos niveles ontológicos involucrados en la química: entre la macroscópica de las sustancias y la micro molecular, y entre la química molecular y la mecánica cuántica. En ambos casos, se enfatiza la profunda ruptura que resulta de la diferencia en las propias categorías ontológicas que estructuran los dominios considerados. Sobre esta base, se discuten posibles perspectivas filosóficas para abordar las relaciones analizadas: reduccionismo, emergentismo y pluralismo. Finalmente, se considera si la química cuántica brinda el nexo adecuado para vincular el nivel físico cuántico con el nivel químico molecular.

Palabras clave: química de las sustancias, química molecular, mecánica cuántica, química cuántica, relaciones interteóricas.

Recibido: 19/03/2024 **Aceptado:** 20/08/2025

INTRODUCCIÓN

Actualmente, una mirada en perspectiva permite afirmar que la filosofía de la ciencia del siglo xx se desarrolló adoptando como modelo las ciencias físicas: los más importantes filósofos de la ciencia se habían formado en física y a ella pertenecían los ejemplos paradigmáticos de la bibliografía. En la segunda mitad del siglo xx, cuando las filosofías de las ciencias particulares comienzan a configurarse, deben definir sus propias agendas de investigación distanciándose de los problemas filosóficos de la física. Mientras que la filosofía de la biología definió su especificidad desde el comienzo, para la de la química la situación fue más difícil: la cercanía entre química y física, así como los muy arraigados supuestos de la reducción de la primera a la segunda, atentaron contra el surgimiento y la consolidación de la filosofía de la química, la cual aparece en el escenario filosófico hasta finales del siglo (McIntyre, 2007).

Frente a esta situación, uno de los problemas más discutidos en el ámbito de la filosofía de la química es la relación entre ésta y la física, con el propósito de brindar argumentos que fundamenten la autonomía de la química como disciplina científica. Sin embargo, como algunos autores señalan (Lombardi y Labarca, 2005), tradicionalmente la defensa de la especificidad de la química se desarrolló en los planos epistemológico y metodológico, bajo el supuesto de la reducción ontológica del mundo químico al físico. Se trataba, entonces, de demostrar la imposibilidad de derivar las leyes y regularidades químicas a partir de las leyes de la física, y poner de manifiesto las peculiaridades del trabajo químico de laboratorio. En este marco, las cuestiones ontológicas no eran discutidas o, en el mejor de los casos, quedaban en segundo plano. Sólo, en los últimos años, las discusiones ontológicas comienzan a ocupar un lugar central en algunos trabajos (Weisberg, Needham y Hendry, 2016; Hendry, 2018), principalmente a través del debate acerca de la existencia de los orbitales químicos (Labarca y Lombardi, 2010) y de la naturaleza de la estructura molecular (Hendry, 2010).

En el presente artículo analizaré la cuestión de la ontología de la química, haciendo énfasis en la existencia de diversos niveles ontológicos que deben diferenciarse claramente en las discusiones acerca de las relaciones interteóricas e interdisciplinarias. Para ello, revisaré la relación entre la química macroscópica de las sustancias y la micro molecular. A continuación, analizaré la relación entre la química molecular y la mecánica cuántica. En los dos casos, enfatizaré

la profunda ruptura ontológica entre los dominios considerados, la cual resulta de la diferencia en las propias categorías ontológicas que estructuran ambos dominios. Esta argumentación permitirá discutir las diferentes perspectivas filosóficas desde las cuales pueden concebirse las relaciones analizadas: reduccionismo, emergentismo y pluralismo. Finalmente, se considerará el ámbito de la química cuántica, evaluando si brinda el nexo adecuado para vincular los niveles físico cuántico y químico molecular.

LA RELACIÓN ENTRE QUÍMICA MACROSCÓPICA Y QUÍMICA MOLECULAR

Históricamente, la primera distinción entre niveles establecida en el seno de la propia química es entre la química macroscópica y la molecular. Mientras que, con Antoine Lavoisier, la química se consolida como la disciplina científica de las sustancias y sus propiedades manifiestas, durante el siglo XIX los químicos comienzan a interesarse en su estructura microscópica, y surge así la idea de molécula como unidad básica para identificar sustancias. Desde un punto de vista filosófico, se impone la pregunta acerca de la relación entre los dos niveles, el de las sustancias y el molecular. En palabras de Michael Weisberg, Paul Needham y Robin Hendry (2016: 56):

> ¿Las teorías macroscópicas y microscópicas de la química se alinean de un modo perfecto? En otras palabras, si tenemos una descripción macroscópica de la materia y una teoría termodinámica acerca de cómo se comporta, ¿puede todo esto reducirse a una descripción molecular? La respuesta parece haber sido 'sí' para muchos filósofos y químicos, pero los filósofos de la química han instado a la precaución sobre este punto.

En relación con esta pregunta, Weisberg, Needham y Hendry (2016) estudian el problema de la reducción de la termodinámica a la mecánica estadística, ya ampliamente discutido en el ámbito de la filosofía de la física, para mostrar las dificultades del tradicional supuesto de reducción. Señalan que la temperatura puede definirse como energía cinética media por molécula sólo en equilibrio termodinámico, estado que no sólo es macroscópico, sino que también todo intento por definirlo en términos microscópicos exige la introducción de conceptos macroscópicos. Pero, continúan los autores, el caso de la termodinámica es relativamente sencillo cuando se compara con

los intentos de reducción de conceptos químicos en específico. Por ejemplo, la solubilidad puede explicarse de modo aproximado y sólo cualitativo como consecuencia de la afinidad de las moléculas o iones de una sustancia con el correspondiente solvente; más esto no recobra las sutiles características cuantitativas de la solubilidad.

Si bien Weisberg, Needham y Hendry (2016) subrayan correctamente las dificultades de reducir la macro-química de las sustancias a la micro-química molecular, sus argumentos no tratan de dificultades *en principio*, sino de obstáculos epistemológicos de facto. Su enfoque deja abierta la posibilidad de que la reducción entre los dos dominios pueda lograrse en el futuro. Sin embargo, otros autores han señalado que lo que separa ambos ámbitos es una profunda brecha de naturaleza categorial-conceptual, que no es contingente ni superable con el desarrollo ulterior de la ciencia.

En un interesante artículo incluido en el libro *Stuff. The Nature of Chemical Substances*, Joachim Schummer (2008) subraya la profunda diferencia entre una ontología basada en *materia* y una basada en *forma*. Según el autor, la perspectiva de la materia se origina en la antigua Grecia, cuando los filósofos presocráticos concebían la realidad como constituida de sustancias elementales que brindaban unidad a la diversidad. Sin embargo, Platón en su *Timeo* desmaterializa al mundo concibiéndolo como compuesto de figuras geométricas. Con el Renacimiento y el retorno del platonismo, la ontología de la forma adquiere una posición dominante al instalarse la idea de que Dios escribe el libro de la naturaleza en lenguaje matemático. Esta perspectiva, subyacente a las ciencias físicas, dominará el pensamiento occidental hasta el siglo xx, y dejará a la química de las sustancias carente de un marco filosófico apropiado.

Según Schummer, la perspectiva de la forma describe los cuerpos apelando a sus propiedades geométricas intr*ínsecas, como forma y tamaño; e*n consecuencia, el cambio se concibe exclusivamente como movimiento en el espacio. La perspectiva de la materia, en cambio, se ocupa de la composición de los cuerpos, de los materiales particulares que constituyen cada cuerpo. Desde este punto de vista, las propiedades que describen el mundo son disposiciones que, en tanto tales, establecen el comportamiento de las entidades bajo ciertas circunstancias, pero más allá de su tamaño y forma; por lo tanto, el cambio se manifiesta como reacción y transmutación. Precisamente, la dominancia de la perspectiva de la forma puede explicar los repetidos intentos de reducir

las propiedades disposicionales a propiedades no disposicionales en el ámbito de la filosofía analítica de la ciencia del siglo xx.

Mientras la perspectiva de la forma prevalece en las ciencias físicas, en química ambas perspectivas coexisten. El enfoque de la forma se ocupa de las características estructurales de las moléculas, en particular, las geométricas, como ángulos y distancias. Sin embargo, esta descripción ofrece una información muy pobre acerca de las propiedades disposicionales de las sustancias. En cambio, la macro-química de las sustancias se basa en el enfoque de la materia, que se ocupa de la predicción de las propiedades disposicionales de las sustancias conocidas y de la producción de nuevas a través de reacción y transmutación.

Schummer considera que materia y forma no deben concebirse como dos principios ontológicos opuestos y mutuamente excluyentes, sino como perspectivas epistémicas acerca del mundo que pueden combinarse en el tratamiento de ciertos fenómenos. Si bien esta postura ontológicamente neutral puede resultar fructífera desde un punto de vista instrumental, no puede sostenerse si se intenta ofrecer una imagen coherente acerca de cómo es el mundo. Justo por este motivo, Lucía Lewowicz y Olimpia Lombardi (2013) prefieren analizar el problema en términos ontológicos, señalando la diferencia entre las categorías básicas que subyacen a las ontologías de la química molecular y la de las sustancias. Para ello, las autoras mencionan que una categoría ontológica no es una clase definida por un concepto, como "rojo" o "mortal", que agrupa ciertos individuos bajo cierta propiedad común, no es un *taxon*, como *mamífero* o *felino*, que clasifica individuos preexistentes en clases bien definidas. Las categorías son condiciones para cualquier clasificación, incluso para cualquier discurso acerca del dominio ontológico (Lewowicz, 2005). En términos wittgenstenianos, las categorías no son *dichas* ni por nombres, predicados u otro tipo de palabra. Las categorías son mostradas por el lenguaje a través de su propia estructura.

Sobre esta base, Lewowicz y Lombardi señalan que individuo y *stuff* (término que no traducen para preservar su especificidad) son categorías ontológicas diferentes. Un individuo es un *todo unitario* en tanto es indivisible. Esto significa que no puede dividirse (*infima species*), o bien que, si se divide, los resultados son individuos diferentes del original. A su vez, un individuo se encuentra sujeto a la categoría kantiana de cantidad (unidad-pluralidad): los individuos son o bien uno (cada uno de ellos) o muchos, es decir, una

pluralidad. En el caso plural, los individuos forman agregados, donde se los puede contar. A diferencia de los individuos, una porción de *stuff* puede dividirse en porciones del mismo sin perder su identidad: si un pedazo de tiza se rompe en otros más pequeños, las resultantes también son pedazos de tiza. Sin embargo, un *stuff* no es cada una de sus porciones: el referente de 'tiza' no puede establecerse señalando un pedazo de tiza particular (Soentgen, 2008). Sin embargo, un *stuff* no es tampoco el mero agregado de sus porciones: el referente de la palabra *agua* es algo más allá de todas las porciones de ella que existen en el universo. A pesar del hecho de que las porciones de *stuff* son múltiples, no se comportan como individuos, si se reúnen en un agregado, no pueden contarse: el agregado de dos porciones de agua no es "dos aguas", sino "más agua". Además, mientras los individuos preservan su identidad en el agregado, las porciones de *stuff*, una vez que se las reúne, ya no pueden reidentificarse: no puede decirse que "ésta" es una y "aquélla" es la otra de las porciones originales de agua reunidas (Laycock, 2010).

Desde estas caracterizaciones, la macro-química de las sustancias supone una ontología de *stuff* y propiedades disposicionales, mientras la molecular describe una ontología de individuos y propiedades intrínsecas. La química macroscópica se ocupa de las sustancias químicas, simples y compuestas, sus propiedades disposicionales, como la solubilidad o acidez, y los resultados de sus reacciones; en cambio, la molecular se ocupa de objetos como las moléculas, sus formas geométricas y disposiciones espaciales, y eventualmente incluso de sus componentes submoleculares. Si se admite que la diferencia entre los dos dominios no es meramente conceptual, sino categorial, aparece la primera ruptura ontológica en el seno de la propia química: la diferencia no consiste sólo en que los objetos de ambos dominios son diferentes, sino que también los dos dominios se distinguen en su propia estructura básica, en las categorías ontológicas que los constituyen.

LA RELACIÓN ENTRE QUÍMICA MOLECULAR Y MECÁNICA CUÁNTICA

Como señalé en la introducción, uno de los tópicos más discutidos en filosofía de la química es su relación con la física, en particular, mecánica cuántica. En este debate, el nivel de la química de las sustancias se deja de lado y el foco se centra en el de la química molecular. El problema encuentra una de sus principales manifestaciones en las discusiones acerca de la naturaleza de

la estructura molecular, entendida como el arreglo espacial de los núcleos en la molécula. Es importante señalar que no se trata de una noción auxiliar o secundaria, sino del concepto central de la química molecular: la estructura molecular es el elemento más importante en la explicación de la reactividad química, es "el dogma central de la ciencia molecular" (Woolley, 1978: 1074). Como afirma Robin Hendry, "la estructura molecular es tan central para la explicación química que explicar la estructura molecular es casi como explicar la química en su totalidad" (2010: 183). El problema consiste en que el concepto parece no encontrar un lugar apropiado en el contexto de la mecánica cuántica. Mientras que "el alfa y omega de la química molecular es la doctrina de que las moléculas existen como objetos individuales y que cada molécula posee una forma, caracterizada por su marco molecular" (Primas, 1994: 216), la idea clásica de núcleos atómicos concebidos como individuos es, al menos, fuertemente conflictiva en un ámbito cuántico. Algunos autores conciben el problema en términos de relaciones interteóricas, como Brian Sutcliffe y Guy Woolley cuando sostienen: "Nunca hemos afirmado que la estructura molecular no pueda ser reconciliada con o reducida a la mecánica cuántica, o que existe algo 'ajeno' acerca de ella; nuestra afirmación es mucho más modesta. No sabemos cómo hacer la conexión" (2011: 94; véase también Sutcliffe y Woolley, 2012). Por su parte, Hinne Hettema (2012: Capítulo 3) adopta una posición explícitamente reduccionista basada en considerar que la relación interteórica entre química molecular y mecánica cuántica exige relajar el concepto de reducción y, a la vez, introducir ciertas modificaciones teóricas que permitan establecer el nexo deseado (para una crítica a la postura de Hettema, véase Lombardi, 2014a).

Robin Hendry (2004, 2008, 2010), quien se ha ocupado largamente de la cuestión de la estructura molecular, adopta una perspectiva opuesta. Al distinguir con claridad entre los aspectos interteórico y metafísico del debate, considera que éste debe abandonar el ámbito interteórico para ocuparse de aspectos ontológicos, preguntándose cómo se relacionan las entidades y procesos estudiados por cada una de las disciplinas. Aquí se advierte una nueva ruptura, ya que la química molecular trabaja con objetos individuales clásicos que no poseen las características específicas de los sistemas cuánticos. Si bien estas características han sido muy estudiadas, vale la pena recordarlas aquí, ordenándolas bajo tres núcleos claramente identificables: contextualidad, no-separabilidad e indistinguibilidad.

a) En sus orígenes, el principio de Werner Heisenberg fue interpretado en términos epistémicos, lo cual se manifestó en su denominación como *principio de incerteza*: la partícula se encuentra en una posición determinada y tiene un momento cinético preciso, pero no podemos conocerlos simultáneamente. Esta interpretación estaba a la base del llamado *microscopio de Heisenberg*, un experimento mental que él mismo propuso (1930), según el cual la medición de la posición de la partícula perturba su momento y viceversa. A pesar de la amplia difusión de esta interpretación del principio de Heisenberg, el formalismo de los espacios de Hilbert sobre el que se fundamenta la mecánica cuántica muestra claramente que el principio no tiene relación alguna con las mediciones o con perturbaciones inevitables. Por el contrario, es la consecuencia directa de una propiedad formal esencial de la teoría: la existencia de observables incompatibles, representados por operadores que no conmutan. Esta no-conmutatividad es la propiedad matemática que impide que dichos observables posean valores definidos de manera simultánea. Si bien la no-conmutatividad es una propiedad mucho más profunda que la mera incerteza epistémica, aún queda abierta la posibilidad de no poder adscribir valores precisos a observables incompatibles debido a una limitación de las propias leyes de la mecánica cuántica. La limitación podría remediarse agregando algún tipo de *variables ocultas* que permitirían asignar valores definidos a todos los observables del sistema cuántico. Sin embargo, más recientemente, Simon Kochen y Ernst Specker (1967) presentaron un teorema fundamental que prueba, en el contexto del formalismo de los espacios de Hilbert, que cualquier asignación simultánea de valores definidos a todos los observables del sistema cuántico conduce a una contradicción lógica. Esto significa que la mecánica cuántica es esencialmente contextual: sólo pueden asignarse valores definidos de modo consistente en un contexto de observables compatibles. No se trata de que una partícula cuántica posea una posición definida, pero no conozcamos su momento o viceversa: cualquier asignación de valores definidos a observables incompatibles está lógicamente prohibida por la propia estructura de la teoría.
b) De acuerdo con la mecánica clásica, si dos cuerpos interactúan y luego se separan cuando la interacción cesa, sus estados y propiedades vuelven a ser independientes como antes de la interacción. Justo esto precisamente no se cumple en mecánica cuántica debido al fenómeno del *entrelazamiento*

(*entanglement*), identificado inicialmente por Erwin Schrödinger como "*el* rasgo característico de la mecánica cuántica, el que fuerza al completo abandono de la línea de pensamiento clásico" (1935: 555). El entrelazamiento cuántico tiene dos consecuencias inmediatas. En primer lugar, el estado entrelazado de un sistema compuesto no queda determinado por los estados de los sistemas componentes. Esto viola lo que Don Howard (1989) denomina *principio de separabilidad* de la física clásica, según el cual dos sistemas separados en el espacio poseen su propio estado y el estado del sistema compuesto se encuentra completamente determinado por aquellos estados separados. En segundo lugar, los resultados de mediciones sobre subsistemas entrelazados de un sistema compuesto exhiben patrones de correlaciones estadísticas que no resisten la tradicional explicación por causa común (véase, por ejemplo, Hughes, 1989). Cuando la medición se concibe en términos de colapso, una medición que induce colapso en uno de los subsistemas induce un colapso simultáneo en el otro sistema, sin importar qué tan distantes se encuentren los subsistemas entre sí. Cabe subrayar que el entrelazamiento no sólo no desaparece cuando finaliza la interacción, sino que tampoco decrece con la distancia o el tiempo durante la evolución subsiguiente del sistema compuesto. Esto implica que, aun cuando los subsistemas se llevan a diferentes laboratorios muy separados entre sí, las correlaciones persisten indefinidamente.

La no-separabilidad cuántica ha sido interpretada de modos diferentes. Algunos autores la conciben como un síntoma de la naturaleza *no-local* de la realidad, es decir, de la existencia de vínculos causales que pueden actuar a distancia y simultáneamente (por ejemplo, Maudlin, 1994; Lange, 2002; Berkovitz, 2016). En este sentido, la mecánica cuántica violaría la localidad einsteniana, según la cual, si *A* y *B* son entidades espacialmente distantes, entonces una influencia externa sobre *A* no puede tener un efecto simultáneo sobre *B*. Otros autores interpretan la no-separabilidad como manifestación de *holismo* ontológico, según el cual la naturaleza y propiedades de un todo no están determinadas por la naturaleza y las propiedades de sus partes (por ejemplo, Teller, 1986; Esfeld, 2001; Healey, 2016). Desde esta perspectiva, lo que se suele describir como mediciones sobre subsistemas de un sistema compuesto en estado entrelazado son en realidad mediciones de diferentes propiedades de un todo único e indivisible, no analizable en sus partes. Debido a esta característica, la mecánica

cuántica violaría el principio einsteniano de individuación, según el cual los ítems físicos adquieren su identidad individual por su posición espacio-temporal: "Sin tal supuesto de existencia mutuamente independiente (el "ser-así") de cosas espacialmente separadas, un supuesto que se origina en nuestro pensamiento cotidiano, el pensamiento físico, *en el sentido en que nos es familiar* no sería posible" (Einstein, 1948: 321).

c) La llamada *indistinguibilidad* de los sistemas cuánticos es una peculiaridad manifiesta en la estadística cuántica. A pesar del término utilizado para designarla, no se trata de una indistinguibilidad propia de las limitaciones del observador, sino de una característica específica de los sistemas cuánticos en su comportamiento colectivo.

En su libro sobre identidad e individualidad en física, Steven French y Decio Krause (2006) señalan que la categoría de individuo requiere algún tipo de *principio de individualidad* que la respalde. La cuestión metafísica es, entonces, decidir ese principio, es decir, qué confiere individualidad a los individuos. En la historia de la filosofía se han propuesto diferentes respuestas a esta pregunta, pero todas ellas deben explicar qué hace a un individuo ser ese individuo y no otro, y qué hace que un individuo sea el mismo a través del cambio de sus propiedades. Ahora bien, consideremos la distribución de dos partículas, 1 y 2, sobre dos estados $|\Phi\rangle$ y $|\varphi\rangle$. La pregunta es: ¿cuántas combinaciones son posibles para obtener el estado del sistema compuesto? La respuesta clásica es la estadística de Maxwell-Boltzmann, de acuerdo con la cual existen cuatro combinaciones posibles, incluso cuando las partículas sean epistémicamente indistinguibles: si son individuos, cualquier principio de individualidad adoptado, no importa cuál, hace que la partícula 1 en $|\Phi\rangle$ y la partícula 2 en $|\varphi\rangle$ sea una combinación diferente a la partícula 1 en $|\varphi\rangle$ y la partícula 2 en $|\Phi\rangle$. La peculiaridad de la mecánica cuántica es que la permutación de las partículas no conduce a una combinación diferente, y ello se manifiesta en las estadísticas cuánticas de Fermi-Dirac (para fermiones) y de Bose-Einstein (para bosones).

Muchos autores han señalado el profundo desafío que la indistinguibilidad cuántica representa para la categoría de individuo. En la década de 1960, Heinz Post (1963) argumentaba que las partículas elementales deben concebirse como *no-individuos* en algún sentido. Paul Teller (1998) analizó el problema en términos de la noción medieval de *haecceidad*, esto es, lo

que hace a un individuo ser diferente de todos los demás de un modo que trasciende todas sus propiedades. Según este autor, todos los enigmas acerca de la estadística cuántica tienen su origen, explícito o tácito, en la creencia en la *haecceidad* de las partículas. La idea de que las partículas cuánticas no son individuos adquirió un contenido positivo en trabajos más recientes (Lombardi y Castagnino, 2008; da Costa y Lombardi, 2014; Lombardi y Dieks, 2016), en los cuales se propone que la ontología cuántica es de propiedades, sin individuos, donde los sistemas cuánticos son haces de propiedades carentes de toda individualidad.

Esta presentación de la contextualidad, la no-separabilidad y la indistinguibilidad cuánticas, si bien breve y carente de formalismos, parece suficiente para comprender los escollos para concebir una partícula cuántica como un individuo en el tradicional sentido filosófico del término. En efecto, las partículas cuánticas siempre tienen propiedades con valores indefinidos; y ello no es una limitación meramente epistémica, sino un estado de cosas descrito por la teoría. Por otra parte, luego de interactuar, las partículas cuánticas quedan inextricablemente vinculadas de un modo que no disminuye ni con el tiempo ni con la distancia, y que atenta contra su propia existencia independiente. Por último, en su comportamiento colectivo, las partículas cuánticas pierden su individualidad para convertirse en un conglomerado de entidades diferentes sólo en número. Sin duda, la cuestión de la categoría ontológica de las entidades cuánticas sigue siendo un problema abierto. No obstante, sí puede afirmarse que se encuentran muy lejos de las entidades localizadas y distinguibles de las que habla la química molecular, cuando describe la estructura molecular a través de las posiciones espaciales de los núcleos, así como de las distancias y ángulos que se calculan en forma teórica y se miden mediante técnicas ópticas.

¿REDUCCIÓN, EMERGENCIA O PLURALISMO?

Hasta aquí se han identificado tres niveles que intervienen en las discusiones acerca de la ontología de la química: el de la macro-química de las sustancias, el de la micro-química molecular, y el cuántico subyacente. La pregunta es ¿cómo se relacionan?

La respuesta tradicional surge de la perspectiva reduccionista: se trataría de ejemplos de reducción interteórica heterogénea a la Nagel (1962), o de

reducción con combinación de dominios (*domain-combining reduction*) según Thomas Nickles (1973), o reducción inter-nivel según Willian K. Wimsatt (1976). Más allá de las diferencias entre las tres propuestas, en todos los casos se trata de relaciones asimétricas entre cuerpos teóricos expresados en diferentes lenguajes: la reducción, por tanto, exige conectar ambos lenguajes mediante las llamadas leyes-puente.

El estatuto de las leyes-puente es el aspecto más conflictivo en los debates acerca del modelo nageliano de reducción, ello es comprensible porque el modo de entender el concepto de reducción depende esencialmente de cómo interpreten las leyes-puente. Si bien Nagel las introduce como bi-condicionales, de inmediato señala que, según la naturaleza de la relación postulada, pueden expresar vínculos de significado, meras convenciones o relaciones fácticas. Estas observaciones ponen claramente de manifiesto que la forma lógica bi-condicional de las leyes-puente no resulta suficiente para determinar el tipo de relación interteórica que establecen. Pero las alternativas que ofrece Nagel han abierto las puertas a múltiples interpretaciones, desde aquéllas que conciben las leyes-puente como identidades o, al menos, como conexiones legales (Sklar, 1993; Schaffner, 1993; Esfeld y Sachse, 2007; van Riel, 2011), hasta las que las consideran como expresiones de meras correlaciones o coinstanciaciones (Kim, 2008; Klein, 2009; Dizadji Bahmani, Frigg y Hartmann, 2010). Estas interpretaciones se corresponden, respectivamente, con una interpretación fuerte de la reducción, que involucra una relación óntica entre los dominios de las teorías involucradas, y con una interpretación débil de la reducción, concebida como una mera reducción inter-teórica sin connotaciones ontológicas.

No me ocuparé aquí de la reducción en su versión débil, como la defendida por ciertas posturas neo-reduccionistas recientes, que intentan apartarse de la metafísica con un ahínco mayor que el de sus predecesores del Círculo de Viena. Desde esta perspectiva, las relaciones reductivas son relaciones inter-teóricas con connotaciones meramente metodológicas, como la búsqueda de simplicidad y transferencia de confirmación de un ámbito teórico a otro, pero sin implicancia ontológica alguna (véase también Needham, 2010). No me ocuparé aquí de esta versión de la reducción ya que el interés se centra en cuestiones ontológicas.

La reducción en su versión más fuerte concibe las leyes-puente como identidades. Tal vez esta idea estuvo a la base de las ideas originales de Nagel

acerca de reducción: por ejemplo, en su trabajo pionero (1949), asumía que todos los términos de la teoría reducida deben definirse mediante términos de la teoría reductora. Si las leyes-puente fueran estrictamente definiciones, establecerían una reducción eliminativista: en principio todo aquello que puede ser dicho con la teoría reducida podría también ser dicho con la teoría reductora. Y, a su vez, la eliminación teórica brindaría buenos motivos para creer en la eliminación ontológica; como Lawrence Sklar afirma claramente; "Las ondas de luz no están correlacionadas con las ondas electromagnéticas, ya que *son* ondas electromagnéticas" (1967: 120). Esta idea eliminativista ha sido considerada con escepticismo en los casos más tradicionales, como en el de la reducción de la óptica al electromagnetismo (véase Batterman, 2002) o el de la reducción de la termodinámica a la mecánica estadística (véase Sklar, 1993), debido a que no toma en cuenta las dificultades técnicas y conceptuales específicas que obstaculizan la relación reductiva. Si esto es así en las situaciones aparentemente menos conflictivas, las dificultades se agudizan cuando se trata de vincular niveles separados por rupturas ontológicas tan profundas como las señaladas en las secciones anteriores. No se trata de identificar un gas con un conjunto de partículas, sino de vincular ítems que pertenecen a categorías ontológicas tan distintas que hasta difiere la estructura del lenguaje utilizado para referirse a ellos. Las sustancias no son *conjuntos* de moléculas y éstas no son *sistemas* de partículas cuánticas en un sentido tan profundo que no parece posible ningún tipo de identificación.

Si bien la interpretación de las leyes-puente como definiciones establece la identificación entre los dominios de las teorías involucradas, no logra introducir otro ingrediente esencial a la reducción: la asimetría de la relación. En efecto, bajo cualquier lectura, sea débil o fuerte, la reducción es una relación asimétrica: si *A* se reduce de *B*, entonces *B* no se reduce de *A*. Ahora bien, si la relación entre los términos de las teorías es definicional, la asimetría no surge de la propia relación. Esto pone de manifiesto un aspecto pocas veces señalado: la asimetría de la relación reductiva suele no venir impuesta por motivos teórico-formales, sino que es un supuesto ontológico añadido a la relación teórica de modo usualmente implícito e inadvertido. Considero que si se pudiera establecer una identificación entre sustancias químicas y conjuntos de moléculas, y entre moléculas y sistemas de partículas cuánticas, dicha identificación no establecería una asimetría entre ambos polos de la relación: el carácter asimétrico de los vínculos, que permitiría la reducción del macro-nivel

de las sustancias al micro-nivel molecular, y este último al nivel cuántico, es un supuesto de carácter metafísico que se sigue de la creencia en el carácter más básico o fundamental del dominio más micro respecto del más macro.

La concepción de las leyes-puente como conexiones legales no conduce al eliminativismo propio de la concepción definicional, aunque se enfrenta a la cuestión del origen de la asimetría del vínculo reductivo. Esta postura se acerca en ambos sentidos a la perspectiva emergentista, entendida como emergencia ontológica sincrónica (para otras formas de emergencia, véanse Kim, 1999; Rueger, 2000; Humphreys, 2008; O'Connor y Wong, 2015). La noción de emergencia es muy atractiva: respecto del dominio subyacente del cual surgen, los ítems emergentes suelen caracterizarse como novedosos, impredecibles, inexplicables e irreducibles en términos del nivel basal. En palabras de Philip Anderson (1972), 'emergencia' expresa la idea de que el todo no es meramente mayor, sino diferente a la suma de las partes. Sin embargo, apenas se intenta dotar esta idea general de mayor precisión, aparecen muchas formas diferentes de concebir la emergencia, que pueden variar incluso de un autor a otro.

Algunos autores consideran que el concepto de superveniencia da precisión a la noción de emergencia. Por ejemplo, Hilary Putnam (1975) concibe la superveniencia como emergencia porque es posible que las propiedades basales sean diferentes, pero la superveniente sea una y la misma, entonces no se puede decir que la segunda se reduce a las primeras en el sentido de describir lo mismo desde diferentes perspectivas. En la misma línea, Brian McLaughlin (1997) define emergencia como superveniencia de propiedades más superveniencia de leyes fundamentales, mientras Alexander Rueger (2000) la concibe como superveniencia estable y robusta. La superveniencia, que aparece como realizabilidad múltiple en el caso de la reducción de la termodinámica a la mecánica estadística, no resulta tan clara en los casos analizados en este trabajo. Por ejemplo, no puede vincularse una sustancia macro con sus componentes micro ni siquiera como una relación de uno-a-muchos, y ello porque el cambio de nivel implica incluso un cambio en el modo en que el ítem es considerado: la sustancia agua puede encontrarse en equilibrio macroscópico, mientras que a nivel micro es un sistema dinámico en el cual existe una continua disociación de moléculas H_2O en hidrógeno e iones hidroxilos, y una continua recombinación de tales iones para formar nuevamente moléculas H_2O, y éstas a su vez se asocian en polímeros mayores (Needham, 2000; Weisberg, 2005). Aún es más difícil establecer una relación

de realizabilidad múltiple entre el nivel molecular y el nivel cuántico, cuando la propia estructura ontológica de la mecánica cuántica no resulta clara.

Por el contrario, otros autores emergentistas son escépticos acerca de la superveniencia, pues consideran que, aun si las propiedades supervenientes resultan novedosas, las regularidades de alto nivel en las que participan son siempre resultado de las regularidades del nivel basal. Desde esta perspectiva, podría afirmarse que el dominio de la macro-química no meramente superviene, sino que emerge del nivel molecular: en este caso no habría identificación alguna; se trataría de dos niveles ontológicos diferentes vinculados a través de una relación asimétrica. En este caso, la asimetría de la relación de emergencia se introduce como un supuesto ontológico explícito. El desafío de esta forma de emergentismo, que no caracteriza el vínculo de un modo preciso, consiste en ofrecer algo que resulte interesante más allá de la mera afirmación de la novedad del nivel emergente, sea desde un punto de vista filosófico o científico.

Algunos autores son aún más exigentes respecto de la relación de emergencia, al afirmar que el caso paradigmático —o incluso el único caso genuino— de emergencia es el entrelazamiento cuántico (véanse, por ejemplo, Humphreys, 1997; Silberstein y McGeever, 1999; Howard, 2007). Este modo de concebir la emergencia puede parecer promisorio para aplicar al nivel cuántico en su relación con el nivel molecular. Sin embargo, esta primera impresión pronto se desvanece cuando se comprueba que el entrelazamiento es un fenómeno propio del nivel cuántico: los estados entrelazados son estados de sistemas cuánticos, esto es, de sistemas que, tal como se argumentó en la sección anterior, se resisten a ser categorizados como individuos en un sentido tradicional de la categoría ontológica de individuo. En otras palabras, a partir del entrelazamiento no surgen las moléculas como entidades clásicas con sus componentes localizados y distinguibles y con su estructura espacial bien definida. Por lo tanto, esta concepción fuertemente estrecha de la emergencia no sirve para caracterizar la relación entre el dominio de la micro-química molecular y el dominio cuántico en sentido estricto.

En las últimas décadas han surgido muy diversas propuestas ontológicamente pluralistas (Putnam, 1981, 1990; Torretti, 2000, 2008; El-Hani y Pihlström, 2002; Lombardi y Labarca, 2005, 2006; Lombardi, 2014b): si bien las distintas versiones difieren en sus aplicaciones particulares, todas ellas coinciden en el rechazo del realismo metafísico usualmente aludido como

la perspectiva del ojo de Dios, esto es, el supuesto de la existencia de una perspectiva neutral y privilegiada desde la cual la realidad puede describirse científicamente tal como es en sí misma. Desde un punto de vista ontológico, tal vez la postura más claramente pluralista es la que adoptan Olimpia Lombardi y Ana Rosa Pérez Ranzanz (2012) con su pluralismo de raigambre kantiana, según el cual los dominios ontológicos de la ciencia se constituyen como una síntesis entre la realidad independiente, "nouménica", y los esquemas categoriales y conceptuales implícitos en nuestras teorías científicas. Tales esquemas adquieren estabilidad como consecuencia del éxito pragmático que las teorías que los presuponen. Desde esta perspectiva, la pregunta metafísica acerca de la existencia de un cierto ítem científico, independiente de la teoría y la práctica de la ciencia, carece de sentido.

El pluralismo ontológico fue formulado principalmente como una reacción crítica al reduccionismo ontológico, que pretende reducir la realidad completa a un único dominio, en general, el descrito por la física *fundamental*. Si el pluralismo ontológico se defiende de un modo consistente, también debería rechazarse el emergentismo, incluso en sus formas más débiles. En efecto, desde esta postura, no puede aceptarse ningún supuesto acerca de la estructura de la realidad independiente por fuera de las teorías científicas. Puesto que el dominio supuestamente emergente y el supuestamente basal se encuentran constituidos de igual manera como síntesis entre realidad independiente y esquemas teóricos, no existe ningún punto de vista neutral que pueda adoptarse para afirmar que uno de los dominios tiene prioridad ontológica sobre el otro. Por lo tanto, desde una perspectiva ontológicamente pluralista se acepta la existencia autónoma de los tres dominios, el macro-químico de las sustancias, el micro-químico de las moléculas y el físico cuántico: ninguno de ellos necesita de los otros para existir. De este modo, no son necesarios supuestos metafísicos adicionales para fundamentar la dependencia ontológica de un dominio respecto de otro. Esto no niega que se puedan establecer relaciones teóricas, incluso legales entre ellos; el pluralismo sólo impugna suponer que los vínculos conceptuales y o legales deban leerse como vínculos de prioridad ontológica.

¿QUÉ PAPEL CUMPLE LA QUÍMICA CUÁNTICA?

La química cuántica es una rama cuyo objetivo primario es la aplicación de la mecánica cuántica a los sistemas químicos en el nivel molecular. En el ámbito filosófico, esta disciplina fue estudiada principalmente desde un punto de vista histórico (Simões y Gavroglu, 2001; Gavroglu y Simões, 2012, 2015) y desde una perspectiva metodológica (Scerri, 2004; Hettema, 2009, 2012; Accorinti y Martínez, 2016). Debido a su peculiar posición entre la química y la física, la pregunta acerca de la ontología de la química cuántica parece ofrecer un camino fecundo para comprender las relaciones entre los dominios ontológicos de la química molecular y de la mecánica cuántica. Sin embargo, se trata de una disciplina donde convergen teorías incompatibles sin intento de compatibilización, con lo cual la propia existencia de una ontología consistente para la química cuántica queda fuertemente en entredicho.

En primer lugar, debe recordarse el papel que cumple la aproximación de Born-Oppenheimer, propuesta por Max Born y Robert Oppenheimer (1927) en los inicios de la mecánica cuántica, que constituye la estrategia básica e ineludible de la química cuántica en cualquiera de sus enfoques. El paso crucial de la aproximación de Born-Oppenheimer es la llamada *aproximación de n*úcleo fijo: los núcleos se describen como partículas clásicas en reposo en posiciones definidas, brindando la estructura molecular que produce el campo eléctrico donde se mueven los electrones. Esta aproximación suele justificarse sobre la base de intuiciones clásicas: bajo el supuesto de que la masa nuclear es mucho mayor que la masa electrónica, $M >> m$, se introduce el límite $m / M \rightarrow 0$; puede relegarse así la energía cinética de los núcleos y, en consecuencia, considerarlos en reposo en posiciones definidas. Sin embargo, éste no es un dominio clásico, sino cuántico, donde las intuiciones clásicas generalmente no funcionan (para un análisis detallado de los supuestos que subyacen a la aproximación de Born-Oppenheimer, véase Lombardi y Castagnino, 2010). En efecto, $m / M \rightarrow 0$ es un límite contrafáctico, porque conduce a resultados inconsistentes con la teoría sobre la cual se aplica. Supóngase, por ejemplo, la fricción sobre un cuerpo en el contexto de la mecánica clásica: puede suponerse que la fricción es cero. El supuesto seguro será falso, porque las superficies perfectamente lisas no existen en la realidad. Sin embargo, el supuesto es compatible con la mecánica clásica: la existencia de tales superficies no contradice los postulados de la teoría. La situación es diferente por completo si se supone, en el contexto de la

relatividad especial, que dos objetos separados espacialmente interactúan de manera instantánea: tal supuesto contradice uno de los postulados de la teoría, en particular, el que fija la velocidad de la luz como el límite superior de velocidad de propagación de cualquier interacción física. El límite $m/M \rightarrow 0$ pertenece al segundo tipo de aproximación, pues conduce a una situación que contradice el principio de Heisenberg, ya que permite a los núcleos permanecer en posiciones definidas en reposo, es decir, con un valor definido de momento cinético. Como afirma claramente Hasok Chang:

> […] en esta aproximación de fijación [«*clamping-down*»], los núcleos son tratados esencialmente como partículas clásicas; […] esta imagen es no cuántica de un modo muy fundamental, ya que asignarles simultáneamente posiciones fijas y momentos fijos (a saber, cero) viola el principio de incerteza de Heisenberg. (2015: 198)

Las nociones clásicas no se filtran en la química cuántica sólo a través de la aproximación de Born-Oppenheimer: también los electrones, si bien sujetos a una dinámica regida por la ecuación de Schrödinger, no son concebidos de un modo completamente cuántico. En efecto, no sólo suele ignorarse el teorema de Kochen y Specker, sino que en muchos casos se asigna una interpretación epistémica al principio de Heisenberg: "si el momento se especifica con precisión, es imposible predecir la ubicación de la partícula" (Atkins y de Paula, 2010: 276). Cuando se calcula la densidad electrónica correspondiente a un electrón, en términos del cuadrado de su función de onda, dicha densidad se interpreta como una medida de la probabilidad de que el electrón ocupe una región infinitesimal alrededor de cada punto del espacio físico: éste se concibe como una partícula que siempre tiene una posición definida, pero desconocida, y cuyo valor sólo podemos determinar estadísticamente mediante la ecuación de Schrödinger.

Por otra parte, los métodos utilizados para describir cuantitativamente las moléculas no consideran la no-separabilidad cuántica. Sea que se basen en las funciones de onda (Hartree-Fock) o en las densidades electrónicas (Teoría del Funcional de Densidad) de cada uno de los electrones de la molécula, estos métodos en primer lugar asignan un estado a cada electrón, despreciando la presencia de los restantes electrones de la molécula o considerando esa presencia como un potencial promedio, y en segundo lugar, se ocupan de introducir

aproximaciones para resolver ecuaciones para sistemas de muchos cuerpos que no pueden resolverse por medios analíticos. En general, los esfuerzos se dirigen a mejorar el segundo paso, a fin de obtener mejores soluciones para las ecuaciones, pero no se toma en cuenta que en el primer paso ya se ha ignorado el entrelazamiento cuántico al *trazar* ciertos grados de libertad del sistema compuesto (véase Fortin y Lombardi, 2014). En otras palabras, la química cuántica trata a los electrones como individuos que existen separadamente y entran en interacción: el problema consiste en resolver ecuaciones sin solución analítica que describen sistemas compuestos de muchos de tales individuos. Pero este problema no es distinto al de la mecánica clásica en sistemas de muchos cuerpos, con la única diferencia en la forma de las ecuaciones a resolver.

En cuanto a la indistinguibilidad de los electrones, la química cuántica se mantiene ajena a las discusiones filosóficas: esta cualidad se introduce en la práctica a través del llamado *postulado de simetrización*, que impone una restricción sobre el conjunto de estados: los no simétricos se consideran inaccesibles. Esta estrategia es consistente con la imagen de las partículas cuánticas como individuos en un sentido estadístico: la estadística cuántica se recobra considerando esos estados como posibles, pero nunca actualizados (French, 1998). Sin embargo, en el contexto de la mecánica cuántica, la restricción a estados simétricos (bosones) y antisimétricos (fermiones) aparece como un agregado completamente *ad hoc*, que introduce una estructura excedente en la teoría (Redhead y Teller, 1992).

Por este modo de combinar elementos provenientes de teorías incompatibles, la química cuántica no parece proporcionar una imagen coherente de la realidad a la cual se aplica. A raíz de esto, se ha señalado que la química cuántica es una disciplina basada en modelos en lugar de teorías (Lombardi y Martínez, 2012; Accorinti y Martínez, 2016). Si bien todas las disciplinas científicas utilizan modelos para aplicar sus teorías, tradicionalmente se consideran modelos *de una teoría*, en tanto dependen de ella: el modelo de una teoría no puede conducir a contradicciones con ella, y las correcciones al modelo deben derivar o encontrarse legitimadas por la teoría correspondiente (véanse, por ejemplo, van Fraassen, 1989; da Costa y French, 2003; Le Bihan, 2012). Los modelos de la química cuántica desafían esta postura tradicional, pues integran exitosamente elementos conceptuales provenientes de dominios teóricos diferentes e incompatibles. Por lo tanto, no dependen ni de la mecánica cuántica ni de la mecánica clásica en el sentido recién

mencionado, y tal independencia no es sólo provisional y contingente, sino que también adquiere un carácter constitutivo de la propia disciplina (Lombardi y Martínez, 2012; Accorinti y Martínez, 2016).

La peculiaridad de los modelos de la química cuántica podría esgrimirse en favor de una postura instrumentalista, a veces caracterizada como una concepción de las teorías científicas como "cajas de herramientas" ("*toolbox*") (Cartwright, Shomar y Suárez, 1995; Suárez, 1999, 2009; Suárez y Cartwright, 2008), según la cual las teorías son herramientas útiles para la construcción de modelos. Sin embargo, también se puede adoptar una perspectiva menos radical admitiendo que el carácter no-referencial, meramente instrumental de los modelos, no es una característica genérica de la ciencia, sino una muy peculiar de la química cuántica en tanto disciplina "intermedia" ("*in-between*") (Gavroglu y Simões, 2015). Con independencia del alcance otorgado a esta característica de los modelos de la química cuántica, si se admite que se trata de una disciplina basada en modelos, y éstos integran elementos de teorías incompatibles, debe admitirse que la química cuántica no ofrece una imagen coherente de la realidad: la búsqueda de una ontología como referencia de la química cuántica parece una tarea infructuosa desde su inicio. Por lo tanto, no puede esperarse que la pregunta acerca de la ontología de la química cuántica ofrezca elementos relevantes para comprender cómo se vinculan los dominios ontológicos de la química molecular y de la mecánica cuántica.

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Si bien la filosofía de la química se ha ocupado de los diversos niveles teóricos presentes en el seno de la propia química, en general lo ha hecho desde una perspectiva epistémica o metodológica, bajo el supuesto de que desde un punto de vista ontológico no hay demasiado para decir: en definitiva, la realidad es como la describe la física fundamental. En este artículo he intentado resistir a ese supuesto ontológicamente reduccionista, que conduce de manera directa a lo que algunos autores han denominado *el imperialismo de la física* (Scerri, 2000). Con este fin, adopté una postura neutral, desde la cual los diferentes niveles teóricos fueron considerados en sí mismos con el objetivo de identificar las categorías ontológicas que suponen. Esta tarea puso de manifiesto profundas diferencias estructurales entre los dominios correspondientes a la macro-química de las sustancias y la micro-química molecular, y entre

esta última y la mecánica cuántica. Cuando analicé estas diferencias, desde diferentes perspectivas filosóficas, concluí que las peculiaridades de los tres niveles analizados se constituyen como un escollo difícilmente superable para el reduccionismo ontológico, quedando abiertos el emergentismo y el pluralismo ontológico como enfoques que permiten encarar el problema de las relaciones entre los diferentes dominios sin caer en presupuestos sesgados.

Finalmente, consideré con cierto detalle el ámbito de la química cuántica, en tanto posible recurso teórico para conectar las ontologías molecular y cuántica. Sin embargo, la expectativa no se cumplió al comprobarse que la química cuántica se basa esencialmente en modelos que integran teorías incompatibles y, por tanto, se trata de una disciplina sin aspiraciones referenciales, con objetivos puramente instrumentales. No obstante, cabe señalar aquí que la discusión acerca de la química cuántica se basó en considerar en el nivel cuántico el formalismo de la llamada *teoría cuántica estándar*. Sin embargo, esto no excluye la posibilidad de que otras teorías cuánticas presupongan categorías ontológicas más adecuadas para compatibilizar los dominios molecular y subatómico. La teoría que de inmediato viene a la mente es la mecánica bohmiana (Bohm, 1952a, 1952b), que ofrece una descripción más cercana a la física clásica puesto que las partículas subatómicas son individuos localizados y sus trayectorias pueden definirse de un modo significativo (Tumulka, 2004). Si bien este camino ha empezado a ser explorado (Lombardi, Fortin y Martínez, 2017), su desarrollo será objeto de ulteriores trabajos.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido realizado gracias al apoyo de la Universidad Austral y a la Sociedad Internacional para la Filosofía de la Química (ISPC).

BIBLIOGRAFÍA

Anderson, Philip (1972), "More is different", *Science*, vol. 177, núm. 4047, pp. 393-396.

Accorinti, Henán y Juan Camilo Martínez González (2016), "Acerca de la independencia de los modelos respecto de las teorías", *Theoria. Revista de Teoría, Historia y Fundamentos de la Ciencia*, vol. 31, núm. 2, pp. 225-245.

Atkins, Peter y Julio de Paula (2010), *Physical Chemistry*, Oxford, Oxford University Press.

Batterman, Robert (2002), *The Devil in the Details: Asymptotic Reasoning in Explanation, Reduction, and Emergence*, Nueva York, Oxford University Press.

Berkovitz, Joseph (2016), "Action at a distance in quantum mechanics", en Edward N. Zalta (ed.), *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, disponible en: [http://plato.stanford.edu/archives/spr2016/entries/qm-action-distance/], fecha de consulta: 19/10/2023.

Bohm, David (1952a), "A suggested interpretation of the quantum theory in terms of hidden variables. I", *Physical Review*, vol. 85, núm. 2, pp. 166-179.

Bohm, David (1952b), "A suggested interpretation of the quantum theory in terms of hidden variables. II", *Physical Review*, vol. 85, núm. 2, pp. 180-193.

Born, Max y J. Robert Oppenheimer (1927), "On the quantum theory of molecules", *Annalen der Physik*, vol. 84, pp. 457-484.

Cartwright, Nancy, Towfic Shomar y Mauricio Suárez (1995), "The tool box of science", en William Herfel, Wladyslaw Krajewski, Ilkka Niniiluoto y Ryszard Wójcicki (eds.), *Theories and Models in Scientific Processes*, Ámsterdam, Rodopi, pp. 137-149.

Chang, Hasok (2015), "Reductionism and the relation between chemistry and physics", en Theodore Arabatzis, Jürgen Renn y Anna Simões (eds.), *Relocating the History of Science: Essays in Honor of Kostas Gavroglu*, Dordrecht, Springer, pp. 193-209.

da Costa, Newton y Steven French (2003), *Science and Partial Truth: A Unitary Approach to Models and Scientific Reasoning*, Oxford, Oxford University Press.

da Costa, Newton y Olimpia Lombardi (2014), "Quantum mechanics: ontology without individuals", *Foundation of Physics*, vol. 44, núm. 12, pp. 1246-1257.

Dizadji-Bahmani, Foad, Romn Frigg y Stephan Hartmann (2010), "Who is afraid of Nagelian reduction?", *Erkenntnis*, vol. 73, núm. 3, pp. 393-412.

Einstein, Albert (1948), "Quantenmechanik und Wirklichkeit", *Dialectica*, vol. 2, pp. 320-324.

El-Hani, Charbel y Sami Pihlström (2002), "Emergence theories and pragmatic realism", *Essays in Philosophy*, vol. 3, núm. 3, pp. 143-176.

Esfeld, Michael (2001), *Holism in Philosophy of Mind and Philosophy of Physics*, Dordrecht, Kluwer Academic Publishers.

Esfeld, Michael y Christian Sachse (2007), "Theory reduction by means of functional sub-types", *International Studies in the Philosophy of Sciences*, vol. 21, núm. 1, pp. 1-17.

Fortin, Sebastian y Olimpia Lombardi (2014), "Partial traces in decoherence and in interpretation: What do reduced states refer to?", *Foundations of Physics*, vol. 44, núm. 4, pp. 426-446.

French, Steven (1998), "On the withering away of physical objects", en Elena Castellani (ed.), *Interpreting Bodies. Classical and Quantum Objects in Modern Physics*, Princeton, Princeton University Press, pp. 93-113.

French, Steven y Décio Krause (2006), *Identity in Physics: A Historical, Philosophical and Formal Analysis, Oxford,* Oxford University Press.

Gavroglu, Kostas y Ana Simões (2015), "Philosophical issues in (sub)disciplinary contexts: The case of quantum chemistry", en Eric Scerri y Grant Fisher (eds.), *Essays in the Philosophy of Chemistry*, Oxford, Oxford University Press, pp. 60-79.

Gavroglu, Kostas y Ana Simões (2012), *Neither Physics nor Chemistry. A History of Quantum Chemistry*, Cambridge, MA/Londres, MIT Press.

Healey, Richard (2016), "Holism and nonseparability in physics", en Edward N. Zalta (ed.), *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, disponible en: [http://plato.stanford.edu/archives/spr2016/entries/physics-holism/], fecha de consulta: 12/11/2023.

Heisenberg, Werner (1930), *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Chicago, University of Chicago Press.

Hendry, Robin Findlay (2018), *The Metaphysics of Chemistry*, Oxford, Oxford University Press (en prensa).

Hendry, Robin Findlay (2010), "Ontological reduction and molecular structure", *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, vol. 41, núm. 2, pp. 183-191.

Hendry, Robin Findlay (2008), "Two conceptions of the chemical bond", *Philosophy of Science*, vol. 75, núm. 5, pp. 909-920.

Hendry, Robin Findlay (2004), "The physicists, the chemists, and the pragmatics of explanation", *Philosophy of Science*, vol. 71, núm. 5, pp. 1048-1059.

Hettema, Hinne (2012), *Reducing Chemistry to Physics. Limits, Models, Consecuences*, tesis doctoral en la University of Groningen, Createspace Publishing Platform.

Hettema, Hinne (2009), "Explanation and theory formation in quantum chemistry", *Foundations of Chemistry*, vol. 11, núm. 3, pp. 145-174.

Howard, Don (2007), "Reduction and emergence in the physical sciences: some lessons from the particle physics and condensed matter debate", en Nancey Murphy y William Stoeger (eds.), *Evolution and Emergence: Systems, Organisms, Persons*, Oxford, Oxford University Press, pp. 141-157.

Howard, Don (1989), "Holism, separability and the metaphysical implications of the Bell experiments", en James Cushing y Ernan McMullin (eds.), *Philosophical Consequences of Quantum Theory: Reflections on Bell's Theorem*, Notre Dame, University of Notre Dame Press, pp. 224-253.

Hughes, Richard I. G. (1989), *The Structure and Interpretation of Quantum Mechanics*, Cambridge, MA, Harvard University Press.

Humphreys, Paul (2008), "Synchronic and diachronic emergence", *Minds & Machines*, vol. 18, núm. 4, pp. 431-442.

Humphreys, Paul (1997), "How properties emerge", *Philosophy of Science*, vol. 64, núm. 1, pp. 1-17.

Kim, Jaegwon (2008), "Reduction and reductive explanation. Is one possible without the other?", en Jakob Kallestrup y Jesper Hohwy (eds.), *Being Reduced. New Essays on Reduction, Explanation and Causation*, Oxford, Oxford University Press, pp. 93-114.

Kim, Jaegwon (1999), "Making sense of emergence", *Philosophical Studies*, vol. 95, núm. 2, pp. 3-36.

Klein, Collin (2009), "Reduction without reductionism: A defence of Nagel on connectability", *Philosophical Quarterly*, vol. 59, núm. 234, pp. 39-53.

Kochen, Simon y Ernst Specker (1967), "The problem of hidden variables in quantum mechanics", *Journal of Mathematics and Mechanics*, vol. 17, núm. 1, pp. 59-87.

Labarca, Martín y Olimpia Lombardi (2010), "Why orbitals do not exist?", *Foundations of Chemistry*, vol. 12, núm. 2, pp. 149-157.

Laycock, Henry (2010), "Object", en Edward N. Zalta (ed.), *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, disponible en: [http://plato.stanford.edu/archives/fall2010/entries/object/], fecha de consulta: 12/10/2023.

Lange, Marc (2002), *An Introduction to the Philosophy of Physics*, Oxford, Blackwell Publishing.

Le Bihan, Soazig (2012), "Defending the semantic view: what it takes", *European Journal for Philosophy of Science*, vol. 2, núm. 3, pp. 249-274.

Lewowicz, Lucía (2005), *Del relativismo lingüístico al relativismo ontológico en el último Kuhn*, Montevideo, Departamento de Publicaciones de la Facultad de Humanidades y Ciencias de la Educación, Universidad de la República.

Lewowicz, Lucía y Olimpia Lombardi (2013), "Stuff versus individuals", *Foundations of Chemistry*, vol. 15, núm. 1, pp. 65-77.

Lombardi, Olimpia (2014a), "Linking chemistry with physics: arguments and counterarguments", *Foundations of Chemistry*, vol. 16, núm. 3, pp. 181-192.

Lombardi, Olimpia (2014b), "The ontological autonomy of the chemical world: facing the criticisms", en Eric Scerri y Lee McIntyre (eds.), *Philosophy of Chemistry: Growth of a New Discipline (Boston Studies in the Philosophy and History of Science)*, Dordrecht, Springer, pp. 23-38.

Lombardi, Olimpia, Hernán Accorinti y Juan Camilo Martínez González (2016), "Modelos científicos: el problema de la representación", *Scientiae Studia*, vol. 14, núm. 1, pp. 151-174.

Lombardi, Olimpia y Mario Castagnino (2010), "Matters are not so clear on the physical side", *Foundations of Chemistry*, vol. 12, núm. 2, pp. 159-166.

Lombardi, Olimpia y Mario Castagnino (2008), "A modal-Hamiltonian interpretation of quantum mechanics", *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, vol. 39, pp. 380-443.

Lombardi, Olimpia y Dennis Dieks (2016), "Particles in a quantum ontology of properties", en Tomasz Bigaj y Christian Wüthrich (eds.), *Metaphysics in Contemporary Physics (Poznan Studies in the Philosophy of the Sciences and the Humanities)*, Leiden, Brill-Rodopi, pp. 123-143.

Lombardi, Olimpia, Sebastian Fortin y Juan Camilo Martínez González (2017), "The relationship between chemistry and physics from the perspective of Bohmian mechanics", *Foundations of Chemistry*, vol. 19, núm. 1, pp. 43-49.

Lombardi, Olimpia y Martin Labarca (2006), "The ontological autonomy of the chemical world: A response to Needham", *Foundations of Chemistry*, vol. 8, núm. 2, pp. 81-92.

Lombardi, Olimpia y Martin Labarca (2005), "The ontological autonomy of the chemical world", *Foundations of Chemistry*, vol. 7, núm. 2, pp. 125-148.

Lombardi, Olimpia y Juan Camilo Martínez González (2012), "Entre mecánica cu**á**ntica y estructuras químicas: ¿a qu**é** refiere la química cuántica?", *Scientiae Studia*, vol. 10, núm. 4, pp. 649-670.

Lombardi, Olimpia y Ana Rosa Pérez Ransanz (2012), *Los m*últiples *mundos de la ciencia. Un realismo pluralista y su aplicación a la filosofía de la f*ísica, México, Universidad Nacional Autónoma de México/Siglo XXI.

Maudlin, Tim (1994), *Quantum Nonlocality and Relativity*, Oxford, Blackwell.

McIntyre, Lee (2007), "The philosophy of chemistry: ten years later", *Synthese*, vol. 155, núm. 3, pp. 291-292.

McLaughlin, Brian (1997), "Emergence and supervenience", *Intellectica*, vol. 2, pp. 25-43.

Nagel, Ernest (1962), *The Structure of Science: Problems in the Logic of Scientific Explanation*, Nueva York, Harcourt, Brace & World.

Nagel, Ernest (1949), "The meaning of reduction in the natural sciences", en Robert C. Stauffer (ed.), *Science and Civilization*, Madison, University of Wisconsin Press, pp. 99-135.

Needham, Paul (2010), "Nagel's analysis of reduction: Comments in defense as well as critique", *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, vol. 41, núm. 2, pp. 163-170.

Needham, Paul (2000), "What is water?", *Analysis*, vol. 60, núm. 1, pp. 13-21.

Nickles, Thomas (1973), "Two concepts of intertheoretic reduction", *Journal of Philosophy*, vol. 70, núm. 7, pp. 181-201.

O'Connor, T., Wong, & Yu, H. (2015). Emergent Properties. In E. N. Zalta (Ed.), *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Disponible en: [http://plato.stanford.edu/archives/sum2015/entries/properties-emergent/]. Fecha de Consulta: 02/12/2023.

Post, Heinz (1963), "Individuality and physics", *Listener*, vol. 70, pp. 534-537.

Primas, Hans (1994), "Hierarchic quantum descriptions and their associated ontologies", en Kalervo Vihtori Laurikainen, Claus Montonen y Karri. Sunnarborg (eds.), *Symposium on the Foundations of Modern Physics 1994*, Gif-sur-Yvette, Editions Frontières, pp. 210-220.

Putnam, Hilary (1990), *Realism with a Human Face*, Cambridge-ma, Harvard University Press.

Putnam, Hilary (1981), *Reason, Truth and History*, Cambridge, Cambridge University Press.

Putnam, Hilary (1975), "Philosophy and our mental life", en *Mind, Language, and Reality: Philosophical Papers*, Cambridge, Cambridge University Press, pp. 291-303.

Redhead, Michael y Paul Teller (1992), "Particle labels and the theory of indistinguishable particles in quantum mechanics", *British Journal for the Philosophy of Science*, vol. 43, núm. 2, pp. 201-218.

Rohrlich, Fritz (1989), "The logic of reduction: The case of gravitation", *Foundations of Physics*, vol. 19, núm. 10, pp. 1151-1170.

Rueger, Alexander (2000), "Physical emergence, diachronic and synchronic", *Synthese*, vol. 124, núm. 3, pp. 297-322.

Scerri, Eric (2004), "Just how *ab initio* is *ab initio* quantum chemistry?", *Foundations of Chemistry*, vol. 6, núm. 1, pp. 93-116.

Scerri, Eric (2000), "The failure of reduction and how to resist disunity of the sciences in the context of chemical education", *Science & Education*, vol. 9, núm. 5, pp. 405-425.

Schaffner, Kenneth (2013), "Ernest Nagel and reduction", *Journal of Philosophy*, vol. 109, núms. 8-9, pp. 534-565.

Schrödinger, Erwin (1935), "Discussion of probability relations between separated systems", *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 31, núm. 4, pp. 555-563.

Schummer, Joachim (2008), "Matter versus form, and beyond", en Klaus Ruthenberg y Jaap van Brakel (eds.), *Stuff. The Nature of Chemical Substances*, Würzburg, Königshauen & Neumann, pp. 3-18.

Silberstein, Michael y John McGeever (1999), "The search for ontological emergente", *Philosophical Quarterly*, vol. 49, núm. 195, pp. 182-200.

Simões, Ana y Kostas Gavroglu (2001), "Issues in the history of theoretical and quantum chemistry, 1927-1960", en Carsten Reinhardt (ed.), *Chemical Sciences in the 20th Century. Bridging Boundaries*, Nueva York, Wiley-VCH, pp. 51-74.

Sklar, Lawrence (1993), *Physics and Chance: Philosophical Issues in the Foundations of Statistical Mechanics*, Cambridge, Cambridge University Press.

Sklar, Lawrence (1967), "Types of inter-theoretic reduction", *British Journal for Philosophy of Science*, vol. 18, pp. 109-124.

Soentgen, Jens (2008), "Stuff: a phenomenological definition", en Klaus Ruthenberg y Jaap van Brakel (eds.), *Stuff. The Nature of Chemical Substances*, Würzburg, Königshauen & Neumann, pp. 71-91.

Suárez, Mauricio (2009), *Fictions in Science: Philosophical Essays on Modeling and Idealization*, Nueva York, Routledge.

Suárez, Mauricio (1999), "The role of models in the application of scientific theories: epistemological implications", en Mary Morgan y Margaret Morrison (eds.), *Models as Mediators*, Cambridge, Cambridge University Press, pp. 168-196.

Suárez, Mauricio y Nancy Cartwright (2008), "Theories: tools versus models", *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, vol. 39, núm. 1, pp. 62-81.

Sutcliffe, Brian T. y Ruy G. Woolley (2012), "Atoms and molecules in classical chemistry and quantum mechanics", en Andrea Woody, Robin Findlay Hendry y

Paul Needham (eds.), *Handbook of Philosophy of Science*, vol. 6: *Philosophy of Chemistry*, Oxford, Elsevier, pp. 387-426.

Sutcliffe, Brian T. y Guy R. Woolley (2011), "A comment on Editorial 37", *Foundations of Chemistry*, vol. 13, núm. 2, pp. 93-95.

Teller, Paul (1998), "Quantum mechanics and haecceities", en Elena Castellani (ed.), *Interpreting Bodies. Classical and Quantum Objects in Modern Physics*, Princeton, Princeton University Press, pp. 114-141.

Teller, Paul (1986), "Relational holism and quantum mechanics", *British Journal for the Philosophy of Science*, vol. 37, núm. 1, pp. 71-81.

Torretti, Roberto (2000), "Scientific realism and scientific practice", en Evandro Agazzi y Massimo Pauri (eds.), *The Reality of the Unobservable: Observability, Unobservability and their Impact on the Issue of Scientific Realism*, Dordrecht, Kluwer, pp. 113-122.

Tumulka, Roderich (2004), "Understanding Bohmian mechanics: A dialogue", *American Journal of Physics*, vol. 9, núm. 9, pp. 1220-1226.

van Fraassen, Bas C. (1989), *Laws and Symmetry*, Oxford, Oxford University Press.

van Riel, Raphael (2011), "Nagelian reduction beyond the Nagel model", *Philosophy of Science*, vol. 78, núm. 3, pp. 353-375.

Weisberg, Michael (2005), "Water is not H_2O", en Davis Baird, Eric Scerri y Lee McIntyre (eds.), *Philosophy of Chemistry: Synthesis of a New Discipline*, Nueva York, Springer, pp. 337-345.

Weisberg, Michael, Paul Needham y Robin Hendry (2016), "Philosophy of chemistry", en Edward N. Zalta y Uri Nodelman (eds.), *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, disponible en: [https://plato.stanford.edu/archives/win2016/entries/chemistry/], fecha de consulta: 14/01/2024.

Wimsatt, William K. (1976), "Reductive explanation: A functional account", en Robert S. *Cohen*, Cliff A. Hooker, Alex C. Michalos y James *W*. van Evra (eds.), *PSA 1974: Proceedings of the 1974 meeting of the Philosophy of Science Association*, Dordrecht, Reidel, pp. 671-710.

Woolley, Ruy G. (1978), "Must a molecule have a shape?", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 100, pp. 1073-1078.

Juan Camilo Martínez González: actualmente es Investigador del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) de Argentina e integrante del Instituto de Filosofía Dr. Alejandro Korn de la Universidad de Buenos Aires. Sus líneas de investigación se centran en la filosofía e historia de la química y, de manera especial, en los fundamentos conceptuales de la química cuántica. Desde 2017, se desempeña como Secretario del comité científico de la sociedad Internacional para la filosofía de la química (ISPC) y como profesor adjunto en la Universidad Austral.

D. R. © Juan Camilo Martínez González, Ciudad de México, enero-junio, 2025.